



TITLE:

# プラズマ曝露により形成される材料中の局所構造解析

AUTHOR(S):

吉川, 侑汰

---

CITATION:

吉川, 侑汰. プラズマ曝露により形成される材料中の局所構造解析. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2019, 2018: 44-44

ISSUE DATE:

2019-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/241171>

RIGHT:

プラズマ曝露により形成される材料中の局所構造解析  
Analysis of local structures in plasma-damaged materials

京都大学大学院 工学研究科 航空宇宙工学専攻 推進工学分野 吉川侑汰

### 研究成果概要

プラズマプロセス中に材料表面に生じる欠陥(プラズマ誘起欠陥)は、材料の電気特性変化や機械特性変化を誘発し、半導体デバイスの性能劣化や信頼性劣化に繋がる[1]。これら劣化の起源は、プラズマ誘起欠陥による材料中の電子状態変化であるが、その詳細はわかっていない。本研究では、密度汎関数理論[2]に基づく第一原理計算コード Quantum-Espresso[3]を用いて、プラズマからの原子侵入に起因する潜在欠陥形成による電子状態変化を解析した。実プロセスで用いられるガス種(Ar、Cl、Br など)を種々の材料(Si、 $\text{Si}_3\text{N}_4$ 、 $\text{SiO}_2$ 、BN など)中に挿入したときの電子状態変化を計算した。また、計算から予測される電気特性変化を実験的手法から検証した。Fig. 1 に、プラズマプロセス中に形成される潜在欠陥の一例として、絶縁体である $\beta\text{-Si}_3\text{N}_4$ に Ar 原子を一つ挿入した計算モデルを示す。カットオフエネルギーを 200 Ry とし、PAW 擬波動関数、PBE 汎関数近似を用いて構造最適化を施した。Fig. 2 に、計算から求めた $\beta\text{-Si}_3\text{N}_4$ の電子状態密度(DOS)分布を示す。侵入原子によってバンドギャップ幅が狭まり、さらにバンドギャップ中に原子種に依存したエネルギー準位が出現した。伝導帯近くに形成されたエネルギー準位は、電子伝導のホッピング準位として振る舞い、電気特性変化を誘発すると考えられる。そこで、Ar プラズマ曝露による $\text{Si}_3\text{N}_4$ 薄膜のリーク電流変化を実験的手法から解析した。Fig. 3 に電流-電圧特性の測定結果を示す。低電圧領域において、伝導帯近傍でのエネルギー準位形成に対応するリーク電流の増加が見られた。以上より、プラズマ誘起欠陥による材料物性劣化の詳細な理解・予測には、第一原理計算を用いた電子状態解析が有効と考えられる。今後、プラズマ誘起欠陥のさらなる理解に向け解析を進める予定である。

参考文献:[1] K. Eriguchi, *J. Phys. D* **50**, 333001 (2017). [2] W. Kohm and L. J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, 1133 (1965). [3] P. Giannozzi et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 465901 (2017).

発表論文(謝辞あり): Y. Yoshikawa et al., *Proc. Int. Symp. Dry Process*, Nagoya, 307 (2018).  
発表論文(謝辞なし): Y. Yoshikawa and K. Eriguchi, *Jpn. J. Appl. Phys.* **57**, 06JD04 (2018).

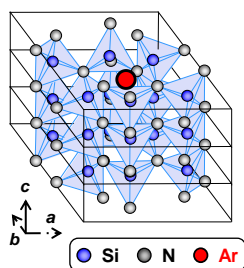


Fig. 1 Starting structure of  $\beta\text{-Si}_3\text{N}_4$  with an Ar interstitial.

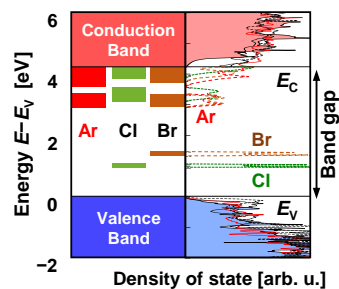


Fig. 2 DOS of  $\beta\text{-Si}_3\text{N}_4$  in local damaged structures with Ar, Cl and Br interstitials.

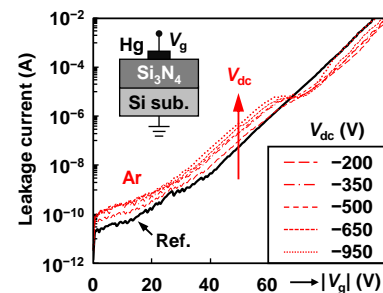


Fig. 3  $I$ - $V$  characteristics of  $\text{Si}_3\text{N}_4$  films exposed to Ar plasma.